

Title	HOPG基板上における分子配列のモデリング
Author(s)	前田, 尚生
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2017), 2016: 45-45
Issue Date	2017-03
URL	http://hdl.handle.net/2433/227977
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

HOPG 基板上における分子配列のモデリング
Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 前田 尚生

研究成果概要

固液界面において機能性分子を配列させる試みは、分子エレクトロニクス観点から近年非常に大きな注目を集めている。形成した配列は走査型トンネル顕微鏡 (STM) を用いて単一分子レベルの分解能で観測することができる。本研究ではキラルな分子であるジアリールエテン閉環体を用いて二次元分子配列中におけるエナンチオマー混合状態の調査を行った。

ジアリールエテン閉環体は、中心部位の絶対構造に由来して (*R,R*) 体と (*S,S*) 体のエナンチオマーを有する。化合物 **1** のラセミ混合物は HOPG 基板上で 6 方向の配列形成が見られたのに対して、化合物 **2** は 3 方向の配列を形成することが分かった (Figure 1a, 2a)。Materials Studio を用いた分子動力学計算により、化合物 **1** と **2** は基板上で異なるコンフォメーションをとることが示唆された (Figure 1b, 2b)。分子配列を形成する濃度領域を詳細に調査することにより、化合物 **1** は固液界面で (*R,R*) 体と (*S,S*) 体が自然分晶することが示唆されたのに対して、化合物 **2** は (*R,R*) 体と (*S,S*) 体がランダムに混ざった混晶を形成することが示唆された (Figure 1c, 2c)。

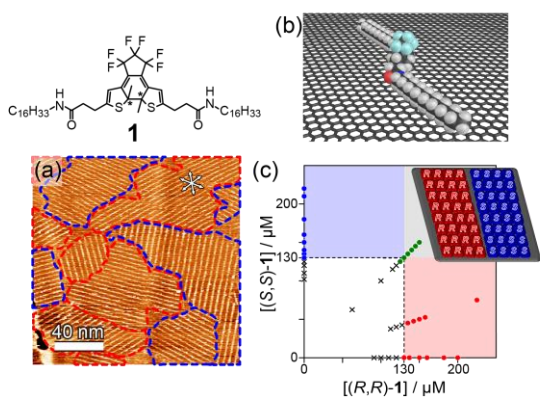


Figure 1. (a) STM image of *rac*-**1** (b) MM model of (*R,R*)-**1** (force field: Dreiding) (c) 2-D solubility phase diagram for **1**.

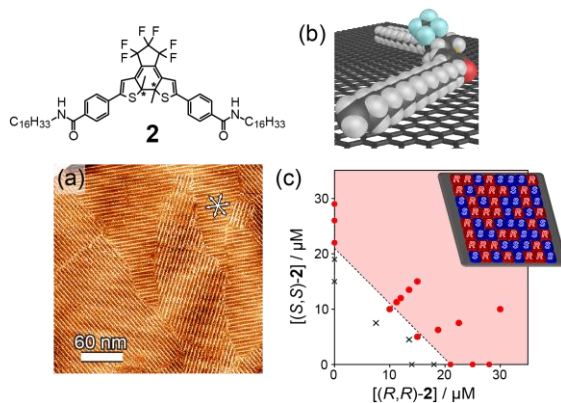


Figure 2. (a) STM image of *rac*-**2** (b) MM model of (*R,R*)-**2** (force field: Dreiding) (c) 2-D solubility phase diagram for **2**.

発表論文(謝辞なし)

N. Maeda, T. Hirose, K. Matsuda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 2371-2375.